

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“08” 05 2019 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**ТЕОРІЯ ПРОЦЕСІВ ЕЛЕКТРОННОГО
ПЕРЕНОСЕННЯ**

для здобувачів освітньо-наукового рівня
Доктор філософії

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **третій (освітньо-науковий)**
освітньо-наукова програма **Хімія**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019/2020**
Період навчання **II рік**
Кількість кредитів ECTS **4 кредити (IV семестр програми підготовки за ОР «доктор філософії»)**
Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**
Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Фрицький Ігор Олегович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «____» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробник: **Фрицький Ігор Олегович, проф., д.х.н., проф.**



ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії



(Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від "09" 04 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від "08" 05 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____ (Роїк О.С.)

"08" 05 2019 року

1. Мета дисципліни – формування системного підходу до вивчення теоретичних основ із сучасних уявлень про процеси електронного перенесення, зокрема, про перенесення електронів у неорганічних і органічних молекулах та в біологічних системах; надання фундаментальних знань з основних закономірностей окисно-відновних процесів, внутрішньо- та зовнішньосферних механізмів електронного перенесення; ознайомлення з теоріями адіабатичного та неадіабатичного перенесення електронів.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

- Знати матеріал навчальних дисциплін, що входять до професійного блоку програми вищої освіти ОКР „магістр” зі спеціальності „хімія”.

- Знати іноземну мову на рівні B2 загальноєвропейських рекомендацій з мовної освіти.

- Вміти аналізувати наукову літературу і інформацію з хімії та суміжних галузей знань, що надаються нормативними курсами для підготовки фахівців ОКР „магістр” зі спеціальності „хімія”.

- Володіти навичками розрахунків у сучасних програмних пакетах.

3. Анотація навчальної дисципліни. Навчальна дисципліна «Теорія процесів електронного перенесення» надає комплексні знання теоретичних основ фундаментальних теорій процесів електронного перенесення в наближенні Борна-Оппенгеймера, теорії Маркуса та теорії Крамерса; сприяє розумінню основних закономірностей окисно-відновних процесів в неорганічних та органічних молекулах і у біохімічних реакціях. В рамках курсу розглядаються питання про електронно-транспортні ланцюги у біологічних системах, зокрема, мітохондріальні та фотосинтетичні електронно-транспортні ланцюги та електронні переноси у білках.

4. Завдання: навчальна задача курсу полягає у здатності розв’язувати комплексні проблеми в галузі професійної та дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та професійної практики.

Навчальний курс забезпечує загальнонаукову підготовку майбутнього доктора філософії, спрямовану на:

- формування системного наукового світогляду, професійної етики та загального культурного кругозору;

- набуття універсальних навичок дослідника, зокрема усної та письмової презентації результатів власного наукового дослідження українською мовою, застосування сучасних інформаційних технологій у науковій діяльності, пошуку та критичного аналізу інформації;

- опанування іноземної мови в обсязі достатньому для представлення та обговорення результатів своєї наукової роботи іноземною мовою (англійською або

іншою відповідно до специфіки спеціальності) в усній та письмовій формі, а також для повного розуміння іншомовних наукових текстів з хімічної спеціальності.

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант має

- уміти знаходити та аналізувати інформацію про системи, де відбувається електронне перенесення із застосуванням адіабатичного наближення;
- уміти продемонструвати поглиблені знання основних закономірностей процесів перенесення електронів в окисно-відновних реакціях, електрохімічних реакціях та біохімічних реакціях фотосинтезу;
- уміти користуватися сучасним програмним забезпеченням для здійснення обробки експериментальних даних з температурних залежностей швидкості процесів електронного перенесення;
- уміти самостійно аналізувати термодинамічні дані, що стосуються процесів електронного перенесення в різних системах.

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у під- сумковій оцінці з дис- ципліни
1. Знання				
1.1	Знати основні закони і закономірності, що визначають напрямок і результат перебігу процесів електронного переносу у гомогенних і гетерогенних системах	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.2	Знати способи аналітичного представлення закономірностей процесів перенесення електронів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.3	Знати системні підходи до аналізу конкретних хімічних процесів, що включають стадію електронного перенесення	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	15
2. Вміння				
2.1	Вміти знаходити та аналізувати інформацію з різних літературних джерел щодо електронного перенесення у різних хімічних процесах	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2.2	Вміти здійснювати кінетичний аналіз експериментальних даних з температурних залежностей швидкості процесів електронного перенесення	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20

3. Комунікація

3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у про основні закономірності окисно-відновних реакцій у системах різної природи	лекції, практичні, самостійні дискусія, вирішення конкретних задач та ситуацій	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.3	Здатність працювати у міжнародному просторі, вироблення у здобувачів практичних навиків командної роботи	лекції, практичні, самостійні семінарське заняття	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

4. Автономність та відповідальність

4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати пошуку	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
4.2	Приймати обґрунтовані рішення, нести відповідальність за власні судження та результати.	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4.3	Демонструвати розуміння особистої відповідальності за професійні та/або управлінські рішення чи надані пропозиції/рекомендації, які можуть впливати на екологічну безпеку.	семінарське заняття, аналітична доповідь, дискусія, вирішення конкретних задач та ситуацій	виконання творчих аналітично-розрахункових робіт, презентація, іспит.	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	3.1	3.2	3.3	4.1	4.2	4.3	
Знання												
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань	+			+				+				
Концептуальні наукові та практичні знання		+		+				+				
Критичне осмислення теорій, принципів, методів і понять у сфері професійної діяльності та/або навчання	+			+								
Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді	+	+	+	+								
Знання основних типів хімічних реакцій та їх характеристики		+	+									
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин	+	+	+	+								
Знання та розуміння періодичного закону та періодичної системи елементів, здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основ	+	+	+	+								
Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку	+			+								
Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів				+	+	+				+	+	
Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів				+	+	+				+	+	
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування для рішення практичних задач	+			+								
Знання основних методів дослідження будови та реакційної здатності біологічних молекул		+	+	+	+	+						
Знання основних механізмів реакцій та каталітичних перетворень		+	+	+	+	+						
Уміння												
Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї				+				+	+			
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей						+	+	+	+	+	+	

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	3.1	3.2	3.3	4.1	4.2	4.3	
Спеціалізовані уміння/навички і методи, необхідні для розв'язання значущих проблем у сфері професійної діяльності, науки та/або інновацій, розширення та переоцінки вже існуючих знань і професійної практики	+			+				+				
Започаткування, планування, реалізація та коригування послідовного процесу ґрунтовного наукового дослідження з дотриманням належної академічної доброчесності		+			+							
Критичний аналіз, оцінка і синтез нових та комплексних ідей				+			+					
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	+				+	+						
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.				+			+	+				
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову доброчесність.							+	+	+	+		
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+			+								
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+		
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.				+			+	+				
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.				+			+	+				
Комунікація Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.				+			+	+	+	+		
Вільне спілкування з питань, що стосуються сфери наукових та експертних знань, з колегами, широкою науковою спільнотою, суспільством в цілому			+					+				

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час практичного заняття та оформлення результатів літературного пошуку;
- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Підсумковий контроль (іспит)	
	Min. – 10 балів	Max. – 30 балів	Min. – 10 балів	Max. – 30 балів	Min. – 24 бали	Max. – 40 балів
Усна відповідь (колоквіум)	2	6	2	6		
Виконання домашньої самостійної роботи	1	2	1	2		
Виконання лабораторних робіт	3	7	3	7		
Модульна контрольна робота 1	4	15				
Модульна контрольна робота 2			4	15		
Підсумковий контроль (іспит)					24	40

Для докторів філософії, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум – 36 балів* для одержання іспиту обов'язково зробити презентацію за результатами літературного пошуку за заданою викладачем темою.

При простому розрахунку отримаємо:

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Іспит	Разом
Max. балів	30	30	40	100
Min. балів*	18	18	24	60

* рекомендований мінімум

До іспиту може бути допущений доктор філософії, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Теорія процесів електронного перенесення", і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі **отримав** за змістовні модулі сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (критично розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для докторів філософії, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум* для заліку або *критично-розрахунковий мінімум* для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання колоквіуму чи МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквіуму / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та передачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності (за умови іспиту)

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно / excellent
85 – 89	4	добре / good
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно / satisfactory
60 – 64		
0 – 59	2	не задовільно / fail

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій

№ теми	Назва теми	Кількість годин			
		лекції	лабораторні	практичні	С/Р
	<i>Змістовий модуль 1. Сучасні теоретичні уявлення про електронне перенесення. Перенесення електрону в неорганічних та органічних молекулах.</i>				
1	Основні закономірності окисно-відновних процесів. Окисники і відновники.	2			13
2	Внутрішньо- та зовнішньосферні механізми електронного переносу. Наближення Борна-Опенгеймера.	2			12
3	Неадіабатичний переніс електрону. Теорія Маркуса для гомогенних та гетерогенних реакцій переносу електрону.	2			12
4	Адіабатичне перенесення електрона, теорія Крамерса	2		2	12
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	1			
	<i>Всього</i>	9			49
	<i>Змістовий модуль 2. Електронне перенесення в біологічних системах</i>				
5	Окисно-відновні процеси в біологічних системах. Перенесення електрона в біохімічних реакціях.	2			12
6	Поняття про електронно-транспортні ланцюги (ЕТЛ) в біологічних системах	2			12
7	Мітохондріальний та фотосинтетичний ЕТЛ, їх основні компоненти.	2			12
8	Електронне перенесення в білках. Цитохроми. Залізо-сірчані протеїни. «Блакитні» мідні електронно-транспортні протеїни.	2		2	13
	<i>Модульна контрольна робота 2</i>	1			
	<i>Всього</i>	9			49
	ВСЬОГО	18		4	98

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **18 год.**

Практичних робіт – **4 год.**

Самостійна робота - **98 год.**

Рекомендована література:

Основна:

1. Докторов А.Б. Основы теории элементарных реакций. Учебное пособие. Новосибирск, Новосибирский госуниверситет, 2010.
2. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Колосс-Химия, 2006.

Додаткова:

1. R. A. Marcus and N. Sutin, Electron transfers in chemistry and biology, *Biochem. Biophys. Acta* **811** (1985) 265 – 322.
2. Э. Г. Петров Физика переноса зарядов в биосистемах. Киев: Наук. Думка, 1984. – 368 с.
3. В. Ф. Гантмахер. Электроны в неупорядоченных средах. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.– 176 с.
4. 1. М.В.Базилевский, В.И.Фаустов "Современные теории химических реакций в конденсированной фазе". *Успехи химии*. 1992, т.61, N. 7, с.1185-1223.
5. П. М. Красильников. Механизмы переноса зарядов в биоструктурах.
<http://erg.biophys.msu.ru/wordpress/study>

Интернет ресурси

www.elch.chem.msu.ru

<https://www.scopus.com/>

<https://journalmetrics.scopus.com/>